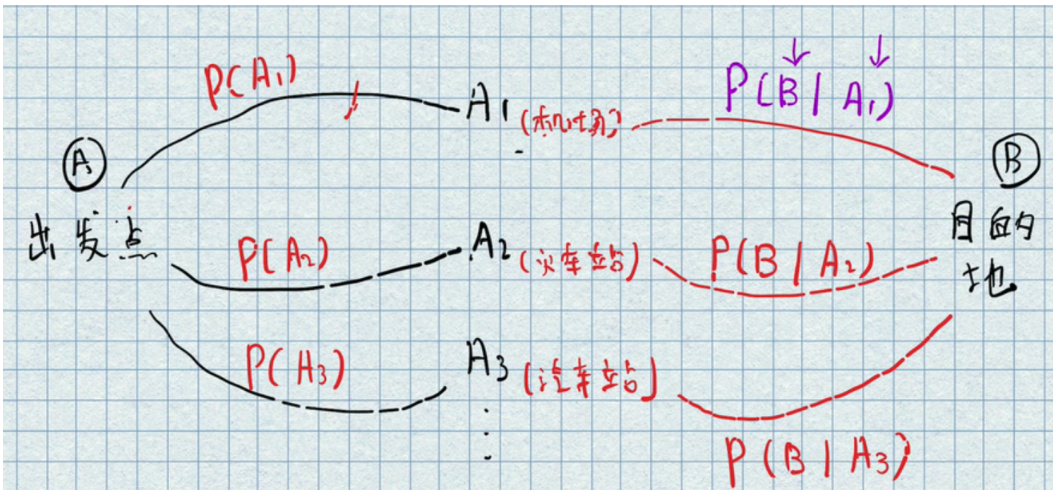
贝叶斯分类器笔记

宋佳欢

2019 年 10 月 12 日

目录

1 全概率与贝叶斯公式



假设某人从 A 到 B 的路径有多条可以选择。则 A 到 B 的概率 P 为 (全概率公式):

$$p = p(A_1)p(B|A_1) + p(A_2)p(B|A_2) + p(A_3)p(B|A_3)$$

若已知到达了 B，推断是从哪条路线过来的？经过第一条路径到达的概率为（贝叶斯公式）：

$$p(A_1|B) = \frac{p(A_1)p(B|A_1)}{p}$$

【总结】

全概率公式：知因推果

贝叶斯公式：知果推因

2 贝叶斯统计思想与贝叶斯估计

两大学派：频率学派、贝叶斯学派。频率学派只利用利用样本信息（样本观测信息）和总体信息（总体分布或总体所属分布提供的信息）。

贝叶斯学派还利用了先验信息（在抽样之前有关统计问题的信息，主要时来源于经验、历史资料），对先验分布进行相应的加工，从而获得先验分布。根据总体分布、样本信息、先验分布，得到后验分布从而进行推断。

两个学派的本质区别：是否利用先验信息。

【注】总体依赖于参数 θ 的概率密度函数，在频率学派中记做 $P(x;\theta)$，而在贝叶斯学派中记为$P(x|\theta)$。

2.1 共轭先验分布

定义：总体分布 $X\ P(X|\theta)$，先验分布为 $\pi(\theta)$，假如抽样后算得的后验分布 $\pi(\theta|x)$ 与先验分布同属于一个分布族，则称先验分布 $\pi(\theta)$ 为总体分布 $X\ P(X|\theta)$ 的一个共轭先验分布。

2.2 后验分布计算

条件概率：

$$P(x|y) = \frac{P(x,y)}{P(y)}$$

贝叶斯公式：

$$P(x|\theta) = \frac{P(\theta|x)P(x)}{\sum P_i}$$

样本 X 与参数 θ 的联合概率分布：

$$h(X,\theta) = P(X|\theta)\cdot\pi(\theta)$$

边缘密度函数：

$$m(x) = \int_\theta h(X,\theta)d\theta = \int_\theta P(X|\theta)\cdot\pi(\theta)d\theta$$

后验分布：

$$\pi(\theta|x) = \frac{h(x,\theta)}{m(x)} = \frac{P(x|\theta)\cdot\pi(\theta)}{\int_\theta P(X|\theta)\cdot\pi(\theta)d\theta}$$

贝叶斯估计：由后验分布来估计参数 θ

1. 使用后验分布密度函数做大作为点估计，即最大后验估计。

$$max\pi(\theta|x) = \frac{h(x,\theta)}{m(x)} = \frac{P(x|\theta)\cdot\pi(\theta)}{m(x)}, \quad \propto maxP(x|\theta)\cdot\pi(\theta)$$

$m(x)$ 为正则化因子

2. 后验分布中位数

3. 后验分布期望

3 朴素贝叶斯分类器

依据贝叶斯公式计算后验概率，将后验概率最大的作为该类别。

$$P(Y|X) = \frac{P(X|Y)\pi(Y)}{\sum P(X)}$$

1. 如果 $\pi(Y)$ 未知，则假设先验概率分布是等概率。所以有

$$maxP(Y|X) \to P(X|Y)$$

2. 如果 $\pi(Y)$ 已知：$maxP(X|Y)\pi(Y)$

求：

$$P(Y|X) \quad \propto \quad P(X|Y)\pi(Y)$$

根据条件概率公式：

$$P(X|Y) = \frac{P(X,Y)}{P(Y)}$$

而联合概率分布未知，所以提出**类条件独立假设** (朴素之处)：即属性 x_i 之间不存在依关系。

$$P(X|Y) = \prod_{i=1}^{n} P(x_i|y_i)$$

4 EM 算法

4.1 最大似然估计

最大似然估计：

$$argmax\Big[\sum_{i=1}^{N} logN(x_i|\mu,\varepsilon)\Big]$$

分别对 μ 和 ε 求偏导，令其导数为 0，得到最优的参数。

4.2 高斯混合模型

高斯混合模型: 两个高斯模型混合的参数 $\bar{\theta} = \{\mu_1, \mu_2, \varepsilon_1, \varepsilon_2\}$。k 个高斯模型的表示

$$P(x|\bar{\theta}) = \sum_{l=1}^{k} \frac{1}{k} N(\mu_l, \varepsilon_l)$$

上式将每个高斯分布同等看待，即权重都是 $\frac{1}{k}$，使得组合的模型的概率分布的积分等于 1。但更常见的是多个模型不等权重组合的情况。得到高斯混合模型：

$$P(x|\bar{\theta}) = \sum_{l=1}^{k} \alpha_l N(\mu_l, \varepsilon_l) \tag{1}$$

$$\sum_{l=1}^{k} \alpha_l = 1 \tag{2}$$

$$\bar{\theta} = \{\mu_1, \mu_2, \cdots, \mu_k, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_k, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k\} \tag{3}$$

在引入高斯混合模型之后，参数的最大似然估计变为：

$$\bar{\theta}_{MLE} = argmax\Big\{\sum_{i=1}^{N} log\big[\sum_{l=1}^{k} \alpha_l N(\mu_l, \varepsilon_l)\big]\Big\}$$

如果再对每个参数进行求偏导并令为 0，这是很难做到的。因此需要使用迭代的算法。

定义下一轮迭代的参数和上一轮的参数之间的关系为：

$$\theta^{(g+1)} = \arg\max_{\theta} \int logP(X, Z|\theta) \cdot P(Z|X, \theta^{(g)}) dZ$$

【注】$P(X|\theta) = P_\theta(X)$，为两个写法。

其中 Z 为隐变量（latent variable），Z 的加入使得简化模型的解法。每个样本点 x_i 的隐变量 $z_i \subset \{1, 2, \cdots, k\}$, 表示该样本点是属于哪个高斯分布的，因此将高斯混合模型简化为了单个的高斯模型。

但是 Z 的加入不能改变数据的边缘分布, 即要使得：

$$P(x_i) = \int_{z_i} P_\theta(x_i|z_i) \cdot P_\theta(z_i) dz_i$$

那么 $P(z_i)$ 是根据高斯混合模型中的权重系数 α 来的，权重越大的高斯分布，其 $P(z_i)$ 也越大。

$$P(z_i) = \alpha_i$$

$$P_\theta(x_i|z_i) = N(\mu_i, \varepsilon_i)$$

因为 z_i 都是正整数，所以积分变为求和, 仍等于高斯混合模型：

$$P(x_i) = \int_{z_i} P_\theta(x_i|z_i) \cdot P_\theta(z_i) dz_i = \sum_{i=1}^{k} \alpha_l N(\mu_i il, \varepsilon_i)$$

将上式代入极大似然估计的公式中，由于 log 函数中是连加，所以无法得到解析解，需要用迭代算法来求解。

4.2.1 EM 算法的有效性证明

EM 算法：

$$\theta^{(g+1)} = \arg\max_{\theta} \int logP(X, Z|\theta) \cdot P(Z|X, \theta^{(g)}) dZ$$

怎么保证迭代算法的有效性，即每一次迭代之后，似然函数要越来越大，这样才是好的。

$$\log P(X|\theta^{(g+1)}) \geq \log(P(X|\theta^{(g)}))$$

所以要证明，加入了隐变量之后的迭代算法能够使得上式成立。根据条件概率公式：

$$logP_\theta(X) = logP_\theta(X,Z) - logP_\theta(Z|X)$$

等式两边对分布 $P_{\theta^{(g)}}(Z|X)$ 取期望：

$$E\big[logP_\theta(X)\big] = E\big[logP_\theta(X,Z) - logP_\theta(Z|X)\big]$$

$$logP_\theta(X) = \int logP(X,Z|\theta) \cdot P(Z|X,\theta^{(g)})dZ - \int logP(Z|X,\theta) \cdot P(Z|X,\theta^{(g)})dZ$$

等式右边第一项就是迭代算法需要 argmax 的对象, 肯定是越来越大的，因此只需证明等式右边第二项会逐渐递减，则整个似然函数就会递增。令:

$$\int logP(Z|X,\theta) \cdot P(Z|X,\theta^{(g)})dZ = H(\theta,\theta^{(g)})$$

因此只需证明 $H(\theta^{(g+1)},\theta^{(g)}) \leq H(\theta,\theta^{(g)})$, 就能证明算法的有效性。证：

$$H(\theta^{(g)},\theta^{(g)}) - H(\theta,\theta^{(g)}) \geq 0$$

$$H(\theta^{(g)},\theta^{(g)})-H(\theta,\theta^{(g)}) = \int logP(Z|X,\theta^{(g)})\cdot P(Z|X,\theta^{(g)})dZ - \int logP(Z|X,\theta)\cdot P(Z|X,\theta^{(g)})dZ$$

$$= \int -log\left(\frac{P(Z|X,\theta)}{P(Z|X,\theta^{(g)})}\right)P(Z|X,\theta^{(g)})dZ$$

根据琴生不等式:-log 函数是凸函数，所以有 (函数的期望大于期望的函数):

$$E[f(x)] \geq f(E[x])$$

$$\int -log\left(\frac{P(Z|X,\theta)}{P(Z|X,\theta^{(g)})}\right)P(Z|X,\theta^{(g)})dZ \geq -log\int \frac{P(Z|X,\theta)}{P(Z|X,\theta^{(g)})}P(Z|X,\theta^{(g)})dZ = -log1 = 0$$

4.2.2 使用 EM

$$\theta^{(g+1)} = \arg\max_\theta \int logP(X,Z|\theta) \cdot P(Z|X,\theta^{(g)})dZ$$

对于每一个样本点 x, 都有与其对应的 z, 而每一对 $\{x_i, z_i\}$ 都是独立的，因此算法迭代式中的 $P(X,Z|\theta)$ 就为：

$$\begin{aligned}P(X,Z|\theta) &= \prod_{i=1}^{n} P(x_i,z_i|\theta)\\ &= \prod_{i=1}^{n} P(x_i|z_i,\theta)P(z_i|\theta)\\ &= \prod_{i=1}^{n} \alpha_{z_i} N(\mu_{z_i},\varepsilon_{z_i})\end{aligned}$$

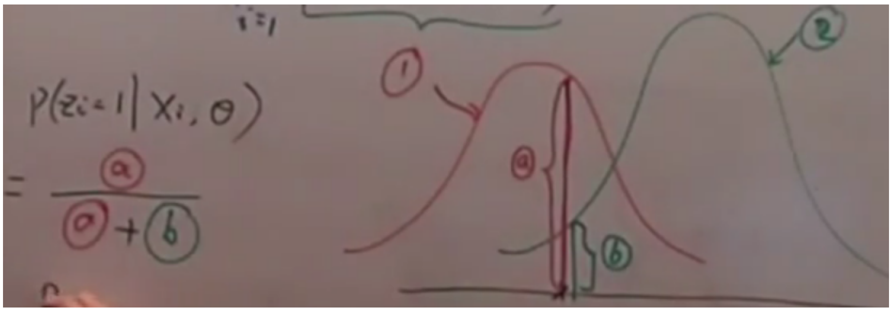
由于样本独立，迭代式中的另一部分可以写成：

$$P(Z|X,\theta)=\prod_{i=1}^{n}P(z_i|x_i,\theta^{(g)})$$

其中连乘的每一项表示为（全概率公式）(该样本属于某个高斯分布的概率)：

$$P(z_i|x_i,\theta)=\frac{P(x_i|z_i)p(z_i)}{\sum_{z_i=1}^{k}P(x_i|z_i)p(z_i)}$$

形象地表示：



将上述的两个部分带入迭代式, 由于 z 为一系列整数，将积分换成求和。(N 个样本，k 个高斯模型)

E-step:(求隐变量？)

$$\sum_{z_1=1}^{k}\sum_{z_2=1}^{k}\cdots\sum_{z_N=1}^{k}\left(\sum_{i=1}^{N}\underbrace{[log\alpha_{z_i}+logN(x_i|\mu_{z_i},\varepsilon_{z_i})]}_{f_i(z_i)}\underbrace{\prod_{i=1}^{n}P(z_i|x_i,\theta^{(g)})}_{P(z_1,\cdots,z_N)}\right)$$

$$=\sum_{z_1=1}^{k}\sum_{z_2=1}^{k}\cdots\sum_{z_N=1}^{k}\Big(f_1(z_1)+f_2(z_2)+\cdots+f_N(z_N)\Big)P(z_1,\cdots,z_N)$$

$$=\sum_{z_1=1}^{k}\sum_{z_2=1}^{k}\cdots\sum_{z_N=1}^{k}f_1(z_1)P(z_1,\cdots,z_N)+\sum_{z_1=1}^{k}\sum_{z_2=1}^{k}\cdots\sum_{z_N=1}^{k}f_2(z_2)P(z_1,\cdots,z_N)+\cdots$$

以第一项为例进行简化：

$$\sum_{z_1=1}^{k}\sum_{z_2=1}^{k}\cdots\sum_{z_N=1}^{k}f_1(z_1)P(z_1,\cdots,z_N)=\sum_{z_1=1}^{k}f_1(z_1)\cdot\underbrace{\sum_{z_2=1}^{k}\cdots\sum_{z_N=1}^{k}P(z_1,\cdots,z_N)}_{P(z_1)\text{的边缘分布}}$$

$$=\sum_{z_1=1}^{k}f_1(z_1)P(z_1)$$

所以 E-step 的步骤可以简化为:

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{z_i=1}^{k}\Big(log\alpha_{z_i}+logN(x_i|\mu_{z_i},\varepsilon_{z_i})\Big)P(z_i|x_i,\theta^{(g)})$$

$$\theta^{(g+1)} = \arg\max_{\theta} \sum_{i=1}^{N} \sum_{z_i=1}^{k} \left(log\alpha_{z_i} + logN(x_i|\mu_{z_i}, \varepsilon_{z_i}) \right) \underbrace{\frac{P(x_i|z_i)p(z_i)}{\sum_{z_i=1}^{k} P(x_i|z_i)p(z_i)}}_{P(z_i|x_i,\theta^{(g)})}$$

M-step:

分别对 α 和 μ, ε 求偏导，并令其等于 0，取极大值。

首先对α求偏导使得：

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{N} \sum_{z_i=1}^{k} log\alpha_{z_i} P(z_i|x_i, \theta^{(g)})}{\partial \alpha_1, \cdots, \partial \alpha_k} = [0 \cdots 0], \quad s.t. \sum_{z_i=1}^{k} \alpha_{z_i} = 1$$

这是一个带约束条件的优化问题，利用拉格朗日乘数法来求解：

$$L(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_k, \lambda) = \sum_{z_i=1}^{k} log\alpha_{z_i} \left(\sum_{i=1}^{N} P(z_i|x_i, \theta^{(g)}) \right) + \lambda \left(\sum_{z_i=1}^{k} \alpha_{z_i} - 1 \right)$$

$$\Longrightarrow \frac{\partial L}{\partial \alpha_i} = \frac{1}{\alpha_i} \left(\sum_{i=1}^{N} P(z_i|x_i, \theta^{(g)}) \right) + \lambda = 0$$

$$\Longrightarrow \sum_{i=1}^{N} P(z_i|x_i, \theta^{(g)}) + \alpha_i \lambda = 0$$

利用约束条件 $\sum_{z_i=1}^{k} \alpha_{z_i} = 1$, 求和:

$$\Longrightarrow \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\sum_{z_i=1}^{k} P(z_i|x_i, \theta^{(g)})}_{=1} + \underbrace{\sum_{z_i=1}^{k} \alpha_i}_{=1} \lambda = 0$$

$$\Longrightarrow N + \lambda = 0, \quad \lambda = -N$$

将 λ 代入可得：

$$\Longrightarrow \alpha_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} P(z_i|x_i, \theta^{(g)}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{p(z_i)N(x_i|\theta^{(g)})}{\sum_{z_i=1}^{k} p(z_i)N(x_i|\theta^{(g)}}$$

对均值求偏导并置之为零：

二维的高斯分布公式：

$$N(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{2\pi|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} exp[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})]$$

其中向量 $\boldsymbol{x} = [x, y]$ 表示样本的坐标，$\boldsymbol{\mu} = [x_0, y_0]$ 为高斯分布的均值，$\boldsymbol{\Sigma}$ 为二维随机变量 x，y 的协方差矩阵。

去除无关项，并代入高斯分布函数：

$$F = \sum_{i=1}^{N} \sum_{z_i=1}^{k} \left(log \frac{1}{2\pi|\boldsymbol{\Sigma}|^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}) \right) P(z_i|x_i, \theta^{(g)})$$

对 $\boldsymbol{\mu}_{z_i}$ 求导：

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{\mu}_{z_i}} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{\Sigma}_{z_i}^{-1}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{z_i}) \underbrace{P(z_i|x_i, \theta^{(g)})}_{\text{常量}} = 0$$

两边同时乘以 $\boldsymbol{\Sigma}_{z_i}$（假设协方差矩阵非奇异），解得：

$$\boldsymbol{\mu}_{z_i} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{P(z_i|x_i, \theta^{(g)})} \sum_{i=1}^{N} P(z_i|x_i, \theta^{(g)}) \boldsymbol{x}_i$$

对 $\boldsymbol{\Sigma}_{z_i}$ 求导，并置为零，解得：

$$\boldsymbol{\Sigma}_{z_i} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{P(z_i|x_i, \theta^{(g)})} \sum_{i=1}^{N} P(z_i|x_i, \theta^{(g)})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{z_i})(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_{z_i})^T$$